

共分散データは面白い

小林 捷平

k_koba84@tg8.so-net.ne.jp

1. はじめに

共分散データの取り扱いに筆者が初めて関わりをもったのは、1979年に Ispra で開催された ASTM-Euratom シンポジウムにおいてドイツ PTB (Physikalisch-Technische Bundesanstalt) の Dr. Wolf Mannhart (以降、Mannhart 氏と記す) との出会いに始まる。当時、IAEA では高速中性子の標準場として ^{252}Cf 自発核分裂中性子スペクトルを、標準的な場として ^{235}U 核分裂中性子スペクトルを提唱していた。Mannhart 氏は、この ^{252}Cf 中性子場を用いてドシメトリー分野で注目される放射化断面積を高い精度で測定していた。同様に筆者もドシメトリーに関わる放射化断面積の積分的な評価の観点から ^{252}Cf 中性子場および ^{235}U 中性子場において多くの核分裂スペクトル平均断面積を測定しており、上記シンポジウムでは両研究グループそれぞれから発表があった。筆者は前もって PTB 訪問をお願いしていたこともあって、シンポジウム後の週末から PTB に Mannhart 氏を訪ねることになった。PTB では早速、筆者らのデータの詳細、データ解析の手順について質問を受け議論を交わすことから始まった。また、彼らの解析手法についても説明を受けると共に、データの信頼度を上げるためには「キチンとしたデータ解析」を行うべきだとして、筆者らのデータに対し共分散データを考慮した誤差解析法の手ほどきを受けることになった。筆者らのデータに対しても、一つ一つについて共分散データ解析のための作業が始まった。その時の成果の一部が後述の Mannhart 氏のレポートに掲載されている[1]。週末、こうした作業・議論を続ける中、休息時には構内を案内してもらい、研究炉 (1MW)、加速器 (サイクロトロン、VdG) 施設の見学をさせてもらったが、最後に Mannhart 氏らが行っていた ^{252}Cf 実験の現場に案内された。丁度、日本の鯉のぼりを上げるように、 ^{252}Cf 線源を照射試料と共にワイヤーに取り付けて、中性子場を乱さないために「空高く掲げて照射する」のだと言う。日曜日朝から継続して共分散データの解析作業・議論を重ね、やっと一段落した所で Braunschweig の街を案内してもらった。昔は王国だったこと、「ライオン」が街のシンボルマークであること、先の世界大戦では壊滅

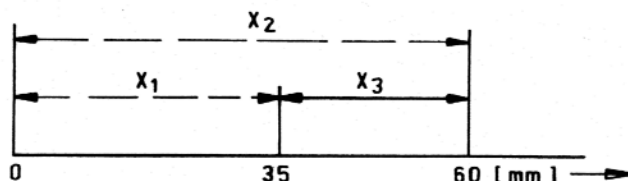
的破壊を受け壊された教会なども、出来る限り使われていた石・ブロックを元の位置に配置して復旧が図られたこと等の説明を受け、ドイツ人気質を改めて感じたことが印象深かった。

最近、共分散データへの関心が再燃気運にあることもあって、この度 IAEA のご尽力により Mannhart 氏がまとめたレポート“A Small Guide to Generating Covariances of Experimental Data” (’81) [1]の改定版が公開される事になった。このレポートは、初めて共分散を学習する場合にも、どのように共分散データを扱うのか、なぜ必要なのか、の課題にも応えてくれる「優れたもの」であり、個人的にも筆者が自信を持って一読をお勧めしたいレポートである。Mannhart 氏は、筆者と議論して作成した共分散による解析例も当該レポートに掲載しており、読者が共分散データを理解する上でも役立つことであろう。

本稿では、共分散を扱った面白い課題として、このレポート[1]の中から 2 つの例題と G.D. James の TOF 実験データ[2]から F.G. Perey が取り上げた解析例[3]について紹介したい。読者の皆さんに共分散法に関心をもって頂き、ご理解頂く上で参考になれば幸いである。

2. 長さ測定（線形関数の場合） [1]

三種類のゲージブロック（計器） l_1 、 l_2 、 l_3 を用いて下図の長さ X_1 、 X_2 、 X_3 を測定する場合、 X_1 は l_1 、 l_2 を、 X_2 は l_1 、 l_3 のゲージを用いると測定できる。ここで、各ゲージが持つ誤差（標準偏差と分散）は、以下の表の様に与えられているとする。



ゲージブロック	長さ(mm)	標準偏差(μm)	分散：Variance (μm^2)
l_1	50	0.05	$\text{Var}(l_1)=0.0025$
l_2	15	0.03	$\text{Var}(l_2)=0.0009$
l_3	10	0.02	$\text{Var}(l_3)=0.0004$

A 氏の測定

X_1 の測定のためには l_1 のゲージ(50 mm)と l_2 のゲージ(15 mm)を、 X_2 の測定のためには l_1 のゲージ(50 mm)と l_3 のゲージ(10 mm)を使った。その時の測定結果は(1)式、(2)式の様になる。ここで $\text{Var}(X_1)$ は X_1 測定分散を表している。

$$X_1 = \ell_1 - \ell_2, \quad \text{Var}(X_1) = \text{Var}(\ell_1) + \text{Var}(\ell_2) = 0.0034 \mu\text{m}^2 \quad (1)$$

$$X_2 = \ell_1 + \ell_3, \quad \text{Var}(X_2) = \text{Var}(\ell_1) + \text{Var}(\ell_3) = 0.0029 \mu\text{m}^2 \quad (2)$$

以上から、 $X_1 = 35 \text{ mm}$ 、標準偏差 $= \sqrt{\text{Var}(X_1)} = 0.058 \mu\text{m}$ (3)

$$X_2 = 60 \text{ mm}、\quad \text{標準偏差} = \sqrt{\text{Var}(X_2)} = 0.054 \mu\text{m} \quad (4)$$

果たして、A 氏の考え方（処理）は正しいのだろうか？

B 氏の測定

X_3 の測定のために ℓ_2 のゲージ(15 mm)と ℓ_3 のゲージ(10 mm)を使った。

$$X_3 = \ell_2 + \ell_3 = 25 \text{ mm}、\quad \text{Var}(X_3) = \text{Var}(\ell_2) + \text{Var}(\ell_3) = 0.0013 \mu\text{m}^2 \quad (5)$$

この両ゲージのデータ間には、共通して関わりの在るものは存在していない。

C 氏の測定

C 氏は X_3 の測定において X_1 の測定結果と X_2 の測定結果を用いた。すると X_3 の測定値は、それぞれの分散値 $\text{Var}(X_1)$ 、 $\text{Var}(X_2)$ を使って次のように計算される。

$$X_3 = X_2 - X_1 = 25 \text{ mm}、\quad \text{Var}(X_3) = \text{Var}(X_2) + \text{Var}(X_1) = 0.0063 \mu\text{m}^2 \quad (6)$$

(5)式と(6)式を比べる時、同じ X_3 の測定に対して、分散値 $\text{Var}(X_3)$ に違いが存在している事が分かる。その原因はどこに在るのだろうか？

さて、再び A 氏の測定に戻ろう。A 氏が行った X_1 と X_2 の測定では、ゲージ ℓ_1 が共通して使われているにも拘らず、この事が最終結果に反映されていない。A 氏の測定の全てを忠実に表せば、(1)式、(2)式の外、 X_1 、 X_2 の両式に共通する項 $\text{Var}(\ell_1)$ が共分散項 $\text{Cov}(X_1, X_2)$ として加わる。この共通項の存在が X_1 と X_2 のデータ間に相関をもたらしている。つまり何らかの繋がりが存在していることになる。

$$\left. \begin{aligned} \text{Var}(X_1) &= \text{Var}(\ell_1) + \text{Var}(\ell_2) = 0.0034 \mu\text{m}^2 \\ \text{Var}(X_2) &= \text{Var}(\ell_1) + \text{Var}(\ell_3) = 0.0029 \mu\text{m}^2 \\ \text{Cov}(X_1, X_2) &= \text{Var}(\ell_1) = 0.0025 \mu\text{m}^2 \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

これらの関係をマトリックス (Covariance Matrix) として表示すれば、

$$\begin{pmatrix} \text{Var}(X_1) & \text{Cov}(X_1, X_2) \\ \text{Cov}(X_1, X_2) & \text{Var}(X_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.0034 & 0.0025 \\ 0.0025 & 0.0029 \end{pmatrix} \quad (8)$$

このマトリックスの非対角要素 $\text{Cov}(X_1, X_2)$ がゼロではない事は、 X_1 と X_2 は独立ではない事になり、 X_1 と X_2 のデータ間には何らかの相関が存在している事を物語る。ここで、マトリックス要素 r_{xy} の定義 $\text{Cov}(x, y) / \{\sqrt{\text{Var}(x)} \sqrt{\text{Var}(y)}\}$ に従って Covariance Matrix から Correlation Matrix への変換を行うと、(8)式は次の様に導ける。

$$\begin{pmatrix} 0.0034 & 0.0025 \\ 0.0025 & 0.0029 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{matrix} 0.058 & (1.00 & 0.80) \\ 0.054 & (0.80 & 1.00) \end{matrix}$$

したがって、(1)式、(2)式に共分散の式が加わった(7)式から、最終結果として次のように

導け、 X_1 と X_2 間の相関係数は 0.80 になる。

測定値	標準偏差	Correlation Matrix
$X_1=35$ mm、	0.058 μm	$\begin{pmatrix} 1.00 & 0.80 \\ 0.80 & 1.00 \end{pmatrix}$
$X_2=60$ mm、	0.054 μm	

これらの情報を全て生かして適用すれば、C 氏が行った X_3 の測定結果は次のように導かれる。 $X_3=X_2-X_1=25$ mm、その標準偏差は 0.036 μm 。何故なら(7)式から

$$\begin{aligned} \text{Var}(X_3) &= \text{Var}\{X_2-X_1\} = \text{Var}(X_2) + \text{Var}(X_1) - 2 \text{Cov}(X_1, X_2) \\ &= 0.0029 + 0.0034 - 2 \times 0.0025 = 0.0013 \mu\text{m}^2 \quad (\text{の平方根が } 0.036 \mu\text{m}) \end{aligned}$$

C 氏が行った測定結果にも共分散を考慮したデータ解析を進めると、 l_2 と l_3 の間には何ら関わりが存在していなかった B 氏の測定結果:(5)式と同じ分散値 $\text{Var}(X_3)=0.0013 \mu\text{m}^2$ が得られている。これを見るとデータ間に何らかの関わりが存在している場合には、お互いの相関を考慮したキチンとしたデータ解析を行えば正しく結果を導き出せる事が分かる。

以上の例題から学べることは、①実験／測定に伴うデータ情報は共分散行列内に含まれており、データの情報提供が不十分な場合は、解析結果の信頼性に影響を与える。②実験／測定誤差情報の詳細は当該者のみが把握できる立場にあり、その意味でも実験／測定に携わった人／グループからのデータ情報の提供は重要になる。③実験／測定に関する誤差の詳細情報は、次のステップに至る誤差解析、誤差伝播においても重要な役割を果たす。

3. 放射化断面積比の誤差解析（非線形関数の場合）[1]

ここでは ^{252}Cf 自発核分裂中性子スペクトル平均断面積（放射化断面積）の比測定の場合を例にとって考える。反応“ i ”に対し、反応率は次式で与えられる。

$$P_i = A_i / \{N_i \varepsilon_i\} \cdot \sum_{\ell} k_i^{\ell} \quad (9)$$

A_i : 計数率、 ε_i : 検出効率、 N_i : 原子核数、 k_i^{ℓ} : 各種実験の補正項。反応 i と j の比を R_{ij}

$$\text{として、次式を定義する。} \quad R_{12} = P_2 / P_1, \quad R_{34} = P_4 / P_3 \quad (10)$$

ここに示した $i=1, 2, 3, 4$ の反応の具体例としては、下記の表に示す反応に対応させる。即ち、それぞれの誤差は(9)式に関わる右辺の各事象に対応して発生する。

表 1 平均断面積測定における実験誤差(%)とその要因 ($a \sim h$ は相関の存在を示す)

Uncertainties (in %) Due to	Symbol	Run-1	Run-1	Run-2	Run-2
		$^{27}\text{Al}(n,\alpha)$	$^{27}\text{Al}(n,p)$	$^{115}\text{In}(n,n')$	$^{24}\text{Mg}(n,p)$
	No.	1	2	3	4
Counting Statistics	A_i	1.6	2.0	1.0	3.2
Efficiency	ε_i	1.06 ^a	1.39 ^a	2.23 ^a	1.06 ^a
Geometrical factor	k_i^G	2.0 ^b	2.0 ^b	2.0 ^b	2.0 ^b
Half life	k_i^T	0.4 ^c	0.5	0.8	0.4 ^c
Mass determination	N_i	0.1 ^d	0.1 ^d	0.1	0.2
Back					
Scattering Irradiation & cooling time	k_i^B	0.7 ^e	1.0 ^e	1.0 ^e	0.7 ^e
Gamma ray attenuation	k_i^H	0.3 ^f	0.5	0.4	0.3 ^f
Gamma ray intensity	k_i^S	0.5 ^g	0.5	1.0	0.5 ^g
Others	k_i^J	0.1 ^h	1.0	1.0	0.1 ^h
	k_i^R	1.0	1.0	1.0	1.0

a : Partially correlated

$$\text{Cor}(\varepsilon_1, \varepsilon_4) = 1.00$$

$$\text{Cor}(\varepsilon_1, \varepsilon_3) = \text{Cor}(\varepsilon_3, \varepsilon_4) = 0.80$$

$$\text{Cor}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \text{Cor}(\varepsilon_2, \varepsilon_4) = 0.94$$

$$\text{Cor}(\varepsilon_2, \varepsilon_3) = 0.95$$

b, e : Fully correlated

c, f, g, h : Fully correlated (same product nucleus)

d : Fully correlated (same foil)

これら相関係数は付録-1を参照。付録1の結果がここに反映・適用され生かされている。
また、誤差要因となる項目・事項間には相関は存在しないと考える。

(9)式を偏微分形で表し

$$(dP_i/P_i) = (dA_i/A_i) - (dN_i/N_i) - (d\varepsilon_i/\varepsilon_i) + \sum_{\ell} dk_i^{\ell}/k_i^{\ell} \quad (11)$$

この数式を便宜上、 $\delta x = dx/x$ の定義に従って書き直すと、

$$\delta P_i = \delta A_i - \delta N_i - \delta \varepsilon_i + \sum_{\ell} \delta k_i^{\ell} \quad (12)$$

同様に(10)式は、 $\delta R_{12} = \delta P_2 - \delta P_1$ 、 $\delta R_{34} = \delta P_4 - \delta P_3$ (13)

と書き表すと、反応 P_i と P_j の比 (即ち断面積の比) R_{ij} の分散、共分散は次式の様に書ける。

$$\left. \begin{aligned} \text{Var}(\delta R_{12}, \delta R_{12}) &= \langle \delta P_1 \delta P_1 \rangle + \langle \delta P_2 \delta P_2 \rangle - 2 \langle \delta P_1 \delta P_2 \rangle \\ \text{Var}(\delta R_{34}, \delta R_{34}) &= \langle \delta P_3 \delta P_3 \rangle + \langle \delta P_4 \delta P_4 \rangle - 2 \langle \delta P_3 \delta P_4 \rangle \\ \text{Cov}(\delta R_{12}, \delta R_{34}) &= \langle \delta P_1 \delta P_3 \rangle + \langle \delta P_2 \delta P_4 \rangle - \langle \delta P_1 \delta P_4 \rangle - \langle \delta P_2 \delta P_3 \rangle \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

ここでブラケット $\langle \rangle$ は、各誤差要素の分散の和を示し、表1の数値を用いた計算手順を次の表2にまとめる。

表2 分散、共分散における各誤差要素項の計算（数値の単位は%表示）

$\langle \delta P_i \delta P_j \rangle$	$\eta_{ij} \langle \delta \varepsilon_i \delta \varepsilon_j \rangle$ $\langle \delta k_i^G \delta k_j^G \rangle$ $\langle \delta k_i^B \delta k_j^B \rangle$ $\langle \delta N_i \delta N_j \rangle$ $\langle \delta k_i^T \delta k_j^T \rangle$ $\langle \delta k_i^H \delta k_j^H \rangle$ $\langle \delta k_i^S \delta k_j^S \rangle$ $\langle \delta k_i^I \delta k_j^I \rangle$
$\langle \delta P_1 \delta P_1 \rangle$	(quadratic sum of all uncertainty contributions)
$\langle \delta P_1 \delta P_2 \rangle$	<u>0.94</u> × <u>1.60</u> × <u>1.39</u> + <u>2.0</u> × <u>2.0</u> + 0.7×1.0 + 0.1×0.1 下線部は各上欄の計算に対応
$\langle \delta P_1 \delta P_3 \rangle$	0.80×1.06×2.23 + 2.0×2.0 + 0.7×1.0
$\langle \delta P_1 \delta P_4 \rangle$	1.00×1.06×1.06 + 2.0×2.0 + 0.7×0.7 + 0.4×0.4 + 0.3×0.3 + 0.5×0.5 + 0.1×0.1
$\langle \delta P_2 \delta P_2 \rangle$	(quadratic sum of all uncertainty contributions)
$\langle \delta P_2 \delta P_3 \rangle$	0.95×1.39×2.33 + 2.0×2.0 + 1.0×1.0
$\langle \delta P_2 \delta P_4 \rangle$	0.94×1.39×1.06 + 2.0×2.0 + 1.0×0.7
$\langle \delta P_3 \delta P_3 \rangle$	(quadratic sum of all uncertainty contributions)
$\langle \delta P_3 \delta P_4 \rangle$	0.8×2.23×1.06 + 2.0×2.0 + 1.0×0.7
$\langle \delta P_4 \delta P_4 \rangle$	(quadratic sum of all uncertainty contributions)

* η_{ij} : 共分散係数。上の表は $\eta_{12} \langle \delta \varepsilon_1 \delta \varepsilon_2 \rangle = 0.94 \times 1.60 \times 1.39$ 、 $\langle \delta k_1^G \delta k_2^G \rangle = 2.0 \times 2.0$ 、----- と順次対応。上欄に書くべき $\langle \delta k_i^G \delta k_j^G \rangle$ 、 $\langle \delta k_i^B \delta k_j^B \rangle$ の標示はスペースの関係で省略。quadratic sum の計算には含まれている。

表2の結果をまとめると、 $\langle \delta P_1 \delta P_1 \rangle = 9.68$ 、 $\langle \delta P_1 \delta P_2 \rangle = 6.09$ 、 $\langle \delta P_1 \delta P_3 \rangle = 6.59$ 、
 $\langle \delta P_1 \delta P_4 \rangle = 6.12$ 、 $\langle \delta P_2 \delta P_2 \rangle = 13.69$ 、 $\langle \delta P_2 \delta P_3 \rangle = 7.94$ 、 $\langle \delta P_2 \delta P_4 \rangle = 5.08$ 、
 $\langle \delta P_3 \delta P_3 \rangle = 14.78$ 、 $\langle \delta P_3 \delta P_4 \rangle = 6.59$ 、 $\langle \delta P_4 \delta P_4 \rangle = 17.40$ となる。

よって(14)式より、次の結果を得る。

$$\begin{aligned} \text{Var}(\delta R_{12}, \delta R_{12}) &= \langle \delta P_1 \delta P_1 \rangle + \langle \delta P_2 \delta P_2 \rangle - 2 \langle \delta P_1 \delta P_2 \rangle = 11.20 && \text{行列の対角成分} \\ \text{Var}(\delta R_{34}, \delta R_{34}) &= \langle \delta P_3 \delta P_3 \rangle + \langle \delta P_4 \delta P_4 \rangle - 2 \langle \delta P_3 \delta P_4 \rangle = 19.00 && \text{行列の対角成分} \\ \text{Cov}(\delta R_{12}, \delta R_{34}) &= \langle \delta P_1 \delta P_3 \rangle + \langle \delta P_2 \delta P_4 \rangle - \langle \delta P_1 \delta P_4 \rangle - \langle \delta P_2 \delta P_3 \rangle = -1.39 && \text{非対角成分} \end{aligned}$$

したがって、共分散行列（誤差ファイル） $\begin{pmatrix} 11.20 & -1.39 \\ -1.39 & 19.00 \end{pmatrix}$ は、相関係数の定義に従えば、

$r_{11} = r_{22} = 1.00$ 、 $r_{12} = r_{21} = -1.39 / \{\sqrt{11.20} \cdot \sqrt{19.00}\} = -0.10$ となる故、断面積比の誤差は

$$\begin{pmatrix} 11.20 & -1.39 \\ -1.39 & 19.00 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{matrix} 3.35 \% \\ 4.36 \% \end{matrix} \quad \begin{pmatrix} 1.00 & -0.1 \\ -0.1 & 1.00 \end{pmatrix} \quad (15)$$

と導かれる。以上の結果をまとめると、

$$\begin{array}{lll} \text{断面積の比} & \text{誤差} & \text{相関係数行列} (\times 100) \\ {}^{27}\text{Al}(n,p) / {}^{27}\text{Al}(n,\alpha) & : 3.35 \% & \begin{pmatrix} 1.00 & \\ & \end{pmatrix} \\ {}^{115}\text{In}(n,n') / {}^{24}\text{Mg}(n,p) & : 4.36 \% & \begin{pmatrix} 1.00 & \\ -10 & 100 \end{pmatrix} \end{array} \quad (16)$$

もし、共分散項を無視すると、(14)式において $\langle \delta P_i \delta P_j \rangle$ のクロスターム ($i \neq j$) が無くなるので、
 $\text{Var}(\delta R_{12}, \delta R_{12}) = \langle \delta P_1 \delta P_1 \rangle + \langle \delta P_2 \delta P_2 \rangle = 9.69 + 13.69 \longrightarrow 4.84 \%$

$$\text{Var}(\delta R_{34}, \delta R_{34}) = \langle \delta P_3 \delta P_3 \rangle + \langle \delta P_4 \delta P_4 \rangle = 14.78 + 17.40 \longrightarrow 5.67 \%$$

となり、(16)式の結果と比べて誤差が大きく異なっている。これは各データが持つ情報が十分活用されていないために生じた結果で、解析結果に対する信頼度が下がることになる。

4. 最尤推定

4.1) 最小二乗法

最も確からしい値を求める最尤推定法として、最小二乗法は良く知られるところである。その基本は次式の χ^2 を最小にするベクトル P' を決定することにある。

$$\chi^2 = (P - P')^t M^{-1} (P - P') + (D^0 - D') V^{-1} (D^0 - D') \quad (17)$$

ここで、対象となる評価値（例えば中性子断面積の評価結果）をベクトル表示で次の様に示す。

$$P = (P_i) = (P_1, P_2, \dots, P_n) \quad ※、 \quad i=1 \sim n \quad (18)$$

P の誤差を表す共分散行列を M とすると、この P と M は計算に先立って既に与えられているとする。次に (P_i) に対応する実験データセットを次式の様に与える。

$$D^0 = (d_i^0), \quad i=1 \sim m \quad (19)$$

その共分散行列を V 、 D^0 に対応する評価値を $D = (d_i)$ とする（例えば direct measurement では $d_i = P_i$ 、ratio measurement では $d_{ij} = P_i / P_j$ ）。 P に代わる新しい値を P' とすると、 D^0 データを fit するモデルは、次式で与えられる。

$$D' = D + G(P' - P) \quad (20)$$

G は $m \times n$ 行列の要素 $g_{ij} = \partial d_i / \partial P_j$ である（direct measurement では G 要素は 1 または 0 となる）。ここで $N = G M G^t$ の定義に従うと、新たなベクトル P' の解とその共分散行列 M' は次式で与えられる。

$$\left. \begin{aligned} P' - P &= M G^{-1} (N + V)^{-1} (D^0 - D) \\ M - M' &= M G^{-1} (N + V)^{-1} G M \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

※ スペースの関係で line vector 表記になっているが、正しくは column vector で縦一列に列記

4.2) 飛行時間分析実験における中性子エネルギーの最尤推定

飛行時間分析実験法による中性子エネルギー測定において、共分散データを適用した場合の実験例について考えてみよう。すなわち、実験で得られた共分散行列の非対角要素も考慮に入れた最小二乗法の導入である。ここでは G.D. James が黒鉛の共鳴のエネルギー：2080 keV を Linac-TOF 法によって測定した時のデータを引用する[2]。中性子エネルギー： E (eV)、飛行距離： L (m)、時間： t (μ sec)の間には、よく知られるように次式の関係がある。

$$E = (72.3 L / t)^2, \quad \therefore dE / E = 2 dL / L - 2 dt / t \quad (22)$$

James の測定に係る 2 回の実験パラメータとしては、次の様に与えられている[2], [3]。

$$\text{Run-1} : L^{(1)} = 100 \text{ m}, \quad \text{その誤差} \quad \delta L_c^{(1)} = 0.003 \text{ m}, \quad \delta t_c^{(1)} = 0.25 \text{ nsec},$$

$$\text{Run-2} : L^{(2)} = 50 \text{ m}, \quad \delta L_c^{(2)} = 0.006 \text{ m}, \quad \delta t_c^{(2)} = 0.5 \text{ nsec},$$

$$\delta L_m = 0, \quad \delta t_m = 0.4 \text{ nsec}.$$

飛行距離は二成分からなるとして $L^{(i)} = L_m + L_c^{(i)}$ 、 $i=1, 2$ 。 L_m は各 Run に共通する距離（例えば中性子源から検出器までの距離）、 $L_c^{(i)}$ は固有の距離（例えば中性子のエネルギーに

依存した検出器内の走行距離)、 $t^{(i)}=t_m+t_c^{(i)}$ 、 $i=1, 2$ も同様に L_m 、 $L_c^{(i)}$ に対応する飛行時間とする。

まず、分散、共分散項 $\text{Var}(L^i, L^i)$ 、 $\text{Cov}(L^i, L^j)$ 、 $i, j=1, 2$ に関する計算では、

$$\left. \begin{aligned} \text{Var}(L^i, L^i) &= \langle \delta L_m \delta L_m \rangle + \langle \delta L_c^{(i)} \delta L_c^{(i)} \rangle + 2 \langle \delta L_m \delta L_c^{(i)} \rangle^* \\ \text{Cov}(L^i, L^j) &= \langle \delta L_m \delta L_m \rangle + \langle \delta L_c^{(i)} \delta L_c^{(j)} \rangle^* + \langle \delta L_m \delta L_c^{(i)} \rangle^* + \langle \delta L_c^{(i)} \delta L_m \rangle^* \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

* 印の項は、相関が無く 0 となる。また、時間成分の分散、共分散も同様に

$$\left. \begin{aligned} \text{Var}(t^i, t^i) &= \langle \delta t_m \delta t_m \rangle + \langle \delta t_c^{(i)} \delta t_c^{(i)} \rangle \\ \text{Cov}(t^i, t^j) &= \langle \delta t_m \delta t_m \rangle \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

と表せる。ここで(22)式の関係を使うと、エネルギーに対する分散、共分散の計算は次式のように求まる。

$$\frac{\langle \delta E^{(i)} \delta E^{(i)} \rangle}{(E^{(i)})(E^{(i)})} = \frac{4 \langle \delta L^{(i)} \delta L^{(i)} \rangle}{(L^{(i)})(L^{(i)})} + \frac{4 \langle \delta t^{(i)} \delta t^{(i)} \rangle}{(t^{(i)})(t^{(i)})} \quad (25)$$

$$\frac{\langle \delta E^{(i)} \delta E^{(j)} \rangle}{(E^{(i)})(E^{(j)})} = \frac{4 \langle \delta L_m \delta L_m \rangle}{(L^{(i)})(L^{(j)})} + \frac{4 \langle \delta t_m \delta t_m \rangle}{(t^{(i)})(t^{(j)})} \quad (26)$$

上に示してきた関係式に James のデータを適用すると、Run-1、Run-2 の測定に対する分散、共分散 $\langle \delta E^{(i)} \delta E^{(j)} \rangle$ 、 $(i, j=1, 2)$ の結果は、次の(27)~(29)式のように導かれる[3]。それらの数値導出計算は付録-2を参照されたい。

$$\text{Var}(\delta E^{(1)}, \delta E^{(1)}) = 0.1688 \text{ keV}^2 \quad (27)$$

$$\text{Var}(\delta E^{(2)}, \delta E^{(2)}) = 1.379 \text{ keV}^2 \quad (28)$$

$$\text{Cov}(\delta E^{(1)}, \delta E^{(2)}) = 0.2204 \text{ keV}^2 \quad (29)$$

したがって、共分散行列 (Covariance Matrix in keV²) V は、 $V = \begin{pmatrix} 0.1688 & 0.2204 \\ 0.2204 & 1.379 \end{pmatrix}$ となる。

James の2回のエネルギー測定値を $D^0 = \begin{pmatrix} 2078.31 \\ 2079.2 \end{pmatrix}$ と与え、この実験では $G = \begin{pmatrix} 1.0 \\ 1.0 \end{pmatrix}$ となる (比測定ではない)。また、実験値に近い評価値として $P = (2078) \text{ keV}$ 、その誤差を 5 keV と大き目に選ぶと、即ち $M = (25)$ とおくと、 $N = \mathbf{GMG}^t$ の定義に従って

$$N = \begin{pmatrix} 1.0 \\ 1.0 \end{pmatrix} (25) (1 \ 1) = \begin{pmatrix} 25 \\ 25 \end{pmatrix} (1 \ 1) = \begin{pmatrix} 25 & 25 \\ 25 & 25 \end{pmatrix}$$

故に(21)式は、

$$P' - 2078 = (25) (1 \ 1) \begin{pmatrix} 25 + 0.1688 & 25 + 0.2204 \\ 25 + 0.2204 & 25 + 1.379 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 2078.31 - 2078 \\ 2079.2 - 2078 \end{pmatrix}$$

$$= (25) (1 \ 1) \begin{pmatrix} 0.9469 & -0.9053 \\ -0.9053 & 0.9034 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.31 \\ 1.2 \end{pmatrix} = 0.2654$$

$$25 - M = (25) (1 \ 1) \begin{pmatrix} 0.9469 & -0.9053 \\ -0.9053 & 0.9034 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} (25) = 24.835$$

以上より、 $P'=2078.27$ 、 $MP=0.165$ ($\sqrt{M'}=0.406\approx 0.41$) を得る。したがって、最終的な評価値及びその誤差は、 2078.27 ± 0.41 keV となる。ここで注目される事は、最尤推定の結果 2078.27 が James の測定値 2078.31 と 2079.2 の間に存在していないことである。非対角要素を含む共分散行列の処理を行った場合、今回のように共分散行列の要素間に $V_{11} < V_{12} < V_{22}$ の関係が存在している場合には、こうした事態が発生すると言われ、この種の問題は Peelle's Pertinent Puzzle (ピールのパズル) 問題として専門家の間では話題となっている[3]~[6]。この場合でも「誤差相関をキチンと評価した」共分散行列の導出が一層重要であることに変わりはないとされる[5]。

5. おわりに

本稿では、三種類の実験を取り上げ、それぞれについて実際の測定数値を引用しながら、実験データ間に存在する相関関係に注目して誤差解析を行う手法を紹介した。これらを通して読者の皆さんには、共分散データの扱いに関心を持って頂くと共に、その重要性をご理解頂く上でも有用と思われる。また、例題にも見られたように、共分散データ解析を進めることで、実験結果に対する信頼度の向上も期待できる。『質の悪いデータの氾濫は、その全体の信頼度を悪くする』と云う Mannhart 氏の弁を待つまでもなく「実験者は丁寧な実験、信頼度の高い実験値の導出に努めなければならない」ことを改めて認識させられた。さらには、その後続くデータ解析、誤差の伝播を考える時、共分散データは誤差解析上重要な役目を果たしている。実験者／測定者側には今後、誤差行列の提示が望まれるところであるが、少なくとも、読み手側でも誤差解析が可能となるだけの十分な実験／測定データや情報提供がなされていることが期待されよう。

本稿をまとめるにあたり、その機会を与えて頂いた IAEA の大塚直彦氏、JAEA の中村詔司氏に感謝致します。

参考資料

- [1] W. Mannhart, "A Small Guide to Generating Covariances of Experimental Data", PTB-FMRB-84 (1981)、および INDC(NDS)-0588, IAEA, 2011.
- [2] G.D. James, Proc. Int. Symp. On Neutron Standards and Applications, NBS Special Publication, 493 (1977) 319.
- [3] F.G. Perey, Proc. Int. Conf. on Neutron Physics and Nuclear Data for Reactors and Other Applied Purposes, Harwell, CONF-780921 (1978) 104.
- [4] 千葉 敏、「ピールのパズルについて (1)」、核データニュース、No.41, p.54~63 (1992)。
- [5] 千葉 敏、「ピールのパズルについて (2)」、核データニュース、No.42, p.16~25 (1992)。
- [6] W. Mannhart, 上記の資料 INDC(NDS)-0588, IAEA, p.49~51, 2011.

付録－1 ガンマ線エネルギーと検出効率に係る共分散行列[1]

三種類のガンマ線エネルギー： $E_1=0.336$ MeV、 $E_2=0.844$ MeV、 $E_3=1.368$ MeV と検出効率の関係を $\varepsilon_i = aE_i^b$ 式で近似する。先ず実験データから最小二乗法によって定数 a 、 b を決定 ($a=2.803E-2$ 、 $b=-1.0659E+0$) した後、上式の偏微分形 $d\varepsilon_i = E_i^b da + aE_i^{b-1} \ln E_i db$, ($i=1\sim 3$) を書きなおして $\delta\varepsilon_i = \delta a + b \ln E_i \delta b$ とした後、本稿 3 章の手法と同様に、分散、共分散データの計算を行う。ここで、 $i=1, 3$ の場合を例にとると、二種類のエネルギー： $E_1=0.336$ MeV、 $E_3=1.368$ MeV に対して、(14)式に相当する計算は次の様になる。

$$\begin{aligned} \text{Var}(\delta\varepsilon_1, \delta\varepsilon_1) &= \langle \delta\varepsilon_1 \delta\varepsilon_1 \rangle = 4.996 \\ \text{Var}(\delta\varepsilon_3, \delta\varepsilon_3) &= \langle \delta\varepsilon_3 \delta\varepsilon_3 \rangle = 1.129 \\ \text{Cov}(\delta\varepsilon_1, \delta\varepsilon_3) &= \langle \delta\varepsilon_1 \delta\varepsilon_3 \rangle = 1.897 \end{aligned}$$

したがって共分散行列は $\begin{pmatrix} 4.9996 & 1.897 \\ 1.897 & 1.129 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{matrix} 2.23 \% & (1.00 \\ 1.06 \% & 0.80 & 1.00) \end{matrix}$ となる。

同様に $i=1, 2$ 、 $i=2, 3$ の場合についても計算を行い、三種類のガンマ線エネルギーに対する相関係数行列をまとめると、以下の結果が得られる。

ガンマ線エネルギー	検出効率(%)	相関係数行列 (×100)
$^{115m}\text{In}(0.336 \text{ keV})$	$\varepsilon_1 \pm 2.23$	$\begin{pmatrix} 100 & & \\ 95 & 100 & \\ 80 & 94 & 100 \end{pmatrix}$
$^{27}\text{Mg}(0.844 \text{ keV})$	$\varepsilon_2 \pm 1.39$	
$^{24}\text{Na}(1.368 \text{ MeV})$	$\varepsilon_3 \pm 1.06$	

この結果は、表 1 の脚注 a：において、相関係数として引用されている。

付録－2 James のデータによる共分散行列の計算 [(27)～(29)式の数値導出の計算]

先ず、(27)式 $\text{Var}(\delta E^{(1)}, \delta E^{(1)})$ の計算： $i=1$ のとき：(25)式に数値を代入して

$$\begin{aligned} \frac{\langle \delta E^{(i)} \delta E^{(i)} \rangle}{\{E^{(i)}\}\{E^{(i)}\}} &= \frac{4 \times (0^2 + 0.003^2)}{100 \times 100} + \frac{4}{t^{(1)} \times t^{(1)}} \times \{(0.4 \times 10^{-3})^2 + (0.25 \times 10^{-3})^2\} \\ &= 3.6 \times 10^{-5} \times 10^{-4} + \frac{4 \times E^{(1)} \times 10^3}{(72.3 \times 100)^2} \times \{0.16 \times 10^{-6} + 0.0625 \times 10^{-6}\} \\ &= 3.6 \times 10^{-9} + \frac{4 \times 2080 \times 10^3}{5.227 \times 10^3 \times 10^4} \times \{0.2225 \times 10^{-6}\}, \quad \because E^{(1)} = 2080 \text{ keV} = 2080 \times 10^3 \text{ eV} \\ &= 3.6 \times 10^{-9} + 354.16 \times 10^{-6-4} = 3.9016 \times 10^{-8} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{したがって、} \langle \delta E^{(1)} \delta E^{(1)} \rangle &= E^{(1)} \times E^{(1)} \times 3.9016 \times 10^{-8} \text{ keV}^2 \\ &= 2.08 \times 10^3 \times 2.08 \times 10^3 \times 3.9016 \times 10^{-8} = 0.1688 \text{ keV}^2 \end{aligned}$$

次に、(28)式 $\text{Var}(\delta E^{(2)}, \delta E^{(2)})$ の計算： $i=2$ のとき：(25)式に数値を代入して

$$\frac{\langle \delta E^{(i)} \delta E^{(i)} \rangle}{\{E^{(i)}\}\{E^{(i)}\}} = \frac{4 \times (0^2 + 0.006^2)}{50 \times 50} + \frac{4}{t^{(2)} \times t^{(2)}} \times \{(0.4 \times 10^{-3})^2 + (0.5 \times 10^{-3})^2\}$$

$$= 4 \times 3.6 \times 10^{-5} / 2500 + \frac{4 \times E^{(2)} \times 10^3}{(72.3 \times 50)^2} \times \{0.16 \times 10^{-6} + 0.25 \times 10^{-6}\}$$

$$= 5.76 \times 10^{-3} \times 10^{-5} + \frac{4 \times 2080 \times 10^3}{1.3068 \times 10^7} \times \{0.41 \times 10^{-6}\}, \because E^{(2)} = 2080 \text{ keV} = 2080 \times 10^3 \text{ eV}$$

$$= 5.76 \times 10^{-8} + 2.61035 \times 10^{3+3-6-7} = 31.8635 \times 10^{-8}$$

$$\text{したがって、} \langle \delta E^{(2)} \delta E^{(2)} \rangle = E^{(2)} \times E^{(2)} \times 31.8635 \times 10^{-8} \text{ keV}^2$$

$$= 2.08 \times 10^3 \times 2.08 \times 10^3 \times 31.8635 \times 10^{-8} = 1.379 \text{ keV}^2$$

最後に、(29)式 $\text{Cov}(\delta E^{(1)}, \delta E^{(2)})$ の計算： $i=1, j=2$ の共分散項：(26)式に数値を代入して

$$\frac{\langle \delta E^{(i)} \delta E^{(j)} \rangle}{\{E^{(i)}\}\{E^{(j)}\}} = \frac{4 \langle \delta t_m \delta t_m \rangle}{\{t^{(i)}\}\{t^{(j)}\}} = \frac{4 \times \{0^2 + (0.4 \times 10^{-3})^2\}}{t^{(1)} \times t^{(2)}}$$

$$= 4 \times 0.16 \times 10^{-6} \times \frac{\sqrt{2.08} \times 10^3 \times \sqrt{2.08} \times 10^3}{72.3 \times 100 \times 72.3 \times 50} \because E^{(1)} = E^{(2)} = 2080 \text{ keV} = 2080 \times 10^3 \text{ eV},$$

$$= 0.64 \times 10^{-6} \times \frac{2.08 \times 10^6}{72.3 \times 100 \times 72.3 \times 50} = 0.64 \times 10^{-6} \times 7.9582 \times 10^{6-4-4} = 5.09325 \times 10^{-8}$$

$$\text{したがって、} \langle \delta E^{(1)} \delta E^{(2)} \rangle = E^{(1)} \times E^{(2)} \times 5.09325 \times 10^{-8} \text{ keV}^2$$

$$= 2.08 \times 10^3 \times 2.08 \times 10^3 \times 5.09325 \times 10^{-8} = 0.2204 \text{ keV}^2$$